

Doc. 1-1 on ss 7 from WPIL using MAX

©Derwent Information

Use of enamine derivatives as ultraviolet-A filters - are more stable than current UV-A filters

Patent Number : EP-852137

International patents classification : A61K-007 42 C07C-057 00 C07C-255 04 C07C-409 22 A61K-007 00 A61K-007 06 A61K-007 40 A61K-007 48 A61K-031 13 A61K-031 235 A61K-031 255 A61K-031 275 A61K-031 425 A61K-031 66 C07C-022 00 C07C-211 49 C07C-217 54

• Abstract :

EP-852137 A Use of enamine derivatives of formula (R3)(R4)NHC(R1)(R2)(I) as UV filters in cosmetic and pharmaceutical preparations for protection of hair or skin against sun-radiation, alone or in combination with UV absorbers is new: R1 = COOR5, COR5, CONRSR6, CN, SO2R5, SO2OR5 or P(=O)(OR7OR8); R2 = COOR6, COR6, CONRSR6, CN, SO2R6, SO2OR6 or P(=O)(OR7OR8); R3 = H, or optionally substituted aliphatic, cycloaliphatic, arylaliphatic or aromatic residue with up to 18C; R4 = optionally substituted 5-12C aromatic or heteroaromatic residue; and R5, R6 = H or aliphatic, arylaliphatic, cycloaliphatic, or optionally substituted aromatic with up to 18C; or R3-R8 together with their bonded carbon atoms may form a 5-6 membered ring which may be further annelated.

USE - (I) are useful as UV-A filters (claimed).

ADVANTAGE - (I) show greater photostability than usual UV-A filters. (Dwg 0'0)

• Publication data :

Patent Family : EP-852137 A2 19980708 DW1998-31 A61K-007:42 Ger 53p • AP: 1997EP-0119397 19971106 DSR: AL AT BE CH DE DK ES FI FR GB GR IE IT LI LT LU LV MC MK NL PT RO SE SI
JP10158140 A 19980616 DW1998-34 A61K-007:42 58p AP:
1997JP-0328052 19971128
AU9745406 A 19980604 DW1998-39 C07C-057/00 AP:
1997AU-0045406 19971127
DE19712033 A1 19980924 DW1998-44 A61K-007:42 AP:
1997DE-1012033 19970321
BR9706035 A 19990518 DW1999-25 C07C-409/22 AP:
1997BR-0006035 19971127
US5945091 A 19990831 DW1999-42 A61K-007:42 AP:
1997US-0972391 19971118
MX9709075 A1 19980501 DW2000-07 A61K-007:42 AP:
1997MX-0009075 19971125
US6037487 A 20000314 DW2000-20 C07C-255/04 FD:
Div ex US5945091 AP: 1997US-0972391 19971118; 1999US-0266968 19990312
Priority n° : 1997DE-1012033 19970321; 1996DE-1049381 19961129
Covered countries : 29
Publications count : 8

• Patentee & Inventor(s) :

Patent assignee : (BADI) BASF AG
Inventor(s) : AUMULLER A; HABECK T; SCHEHLMANN V; WESTENFELDER H; WUNSCH T; AUMUELLER A; HAREMZA S; WUENSCH T

• Accession codes :

Accession N° : 1998-350154 [31]
Related Acc. N° : 1998-313409
Sec. Acc. n° CPI : C1998-108189

• Derwent codes :

Manual code : CPI: A08-A03 A12-V04C
B05-B01E B05-B01F B07-H B10-A08 B10-A09B B10-A15 B10-B02 B14-R05 D08-B09A D09-E E05-G01 E05-G02 E05-G03 E07-H03 E10-A09B E10-A10C E10-A10D E10-A15A E10-A15C E10-B02 E10-B04A2 E10-B04B
Derwent Classes : A96 B07 D21 E19

• Update codes :

Basic update code : 1998-31
Equiv. update code : 1998-34; 1998-39; 1998-44; 1999-25; 1999-42; 2000-07; 2000-20





⑬ BUNDESREPUBLIK
DEUTSCHLAND



DEUTSCHES
PATENTAMT

⑫ **Offenlegungsschrift**
⑩ **DE 197 12 033 A 1**

⑤① Int. Cl.⁶:
A 61 K 7/42
A 61 K 31/235
A 61 K 31/425
A 61 K 31/275

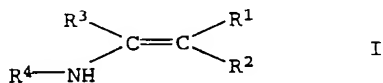
⑦ Aktenzeichen: 197 12 033.4
②② Anmeldetag: 21. 3. 97
④③ Offenlegungstag: 24. 9. 98

DE 197 12 033 A 1

⑦① Anmelder:
BASF AG, 67063 Ludwigshafen, DE

⑦② Erfinder:
Habeck, Thorsten, Dr., 67149 Meckenheim, DE;
Aumüller, Alexander, Dr., 67435 Neustadt, DE;
Schehlmann, Volker, Dr., 67354 Römerberg, DE;
Westenfelder, Horst, 67435 Neustadt, DE; Wünsch,
Thomas, Dr., 67346 Speyer, DE; Haremza, Sylke, Dr.,
69151 Neckargemünd, DE

- ⑤④ Photostabile UV-Filter enthaltende kosmetische und pharmazeutische Zubereitungen
⑤⑦ Verwendung von Verbindungen der Formel I



in der die C=C Doppelbindung in der E oder Z Konfiguration vorliegt und die Variablen folgende Bedeutung haben:

R¹ COOR⁵, COR⁵, CONR⁵R⁶, CN, O=S(-R⁵)=O, O=S(-OR⁵)=O, R⁷O-P(-OR⁸)=O;

R² COOR⁶, COR⁶, CONR⁵R⁶, CN, O=S(-R⁶)=O, O=S(-OR⁶)=O, R⁷O-P(-OR⁸)=O;

R³ Wasserstoff, einen gegebenenfalls substituierten aliphatischen, cycloaliphatischen, araliphatischen oder aromatischen Rest mit jeweils bis zu 18 C-Atomen;

R⁴ einen gegebenenfalls substituierten aromatischen oder heteroaromatischen Rest mit 5 bis 12 Ringatomen; R⁵ bis

R⁸ unabhängig voneinander Wasserstoff, einen offenkettigen oder verzweigten aliphatischen, araliphatischen, cycloaliphatischen oder gegebenenfalls substituierten aromatischen Rest mit jeweils bis zu 18 C-Atomen, wobei die Variablen R³ bis R⁸ untereinander, jeweils zusammen mit den Kohlenstoffatomen, an die sie gebunden sind, gemeinsam einen 5- bis 6-Ring bilden können, der gegebenenfalls weiter anelliert sein kann, als UV-Filter in kosmetischen und pharmazeutischen Zubereitungen zum Schutz der menschlichen Haut oder menschlicher Haare gegen Sonnenstrahlen, allein oder zusammen mit an sich für kosmetische und pharmazeutische Zubereitungen bekannten, im UV-Bereich absorbierenden Verbindungen.

DE 197 12 033 A 1

sche oder gegebenenfalls substituierte, aromatische Reste mit bis zu 8 C-Atomen bedeuten.

Besonders bevorzugt ist die Verwendung von Verbindungen der Formel I, in der R³ für Wasserstoff, R¹ für CN, COOR⁵ und COR⁵ und R² für CN, COOR⁶ und COR⁶ stehen, wobei R⁵ und R⁶ voneinander unabhängig offenkettige oder verzweigte aliphatische oder gegebenenfalls substituierte, aromatische Reste mit bis zu 8 C-Atomen bedeuten und R⁴ für einen gegebenenfalls substituierten aromatischen oder heteroaromatischen Rest mit bis zu 10 C-Atomen im Ring, insbesondere einen substituierten Phenyl-, Thienyl-, Furyl-, Pyridyl-, Indolyl- oder Naphthylrest und besonders bevorzugt für einen gegebenenfalls substituierten Phenyl- oder Thienylrest steht.

Als Substituenten kommen sowohl lipophile als auch hydrophile Substituenten mit z. B. bis zu 20 C-Atomen in Betracht. Lipophile d. h. die Öllöslichkeit der Verbindungen der Formel I verstärkende Reste sind z. B. aliphatische oder cycloaliphatische Reste insbesondere Alkylreste mit 1 bis 18 C-Atomen, Alkoxy-, Mono- und Dialkylamino-, Alkoxy-carbonyl-, Mono- und Dialkylaminocarbonyl-, Mono- und Dialkylaminosulfonylreste, ferner Cyan-, Nitro-, Brom-, Chlor-, Iod- oder Fluorsubstituenten.

Hydrophile d. h. die Wasserlöslichkeit der Verbindungen der Formel I ermöglichende Reste sind z. B. Carboxy- und Sulfoxyreste und insbesondere deren Salze mit beliebigen physiologisch verträglichen Kationen, wie die Alkalisalze oder wie die Trialkylammoniumsalze, wie Tri-(hydroxyalkyl)-ammoniumsalze oder die 2-Methylpropan-1-ol-2-ammoniumsalze. Ferner kommen Alkylammoniumreste mit beliebigen physiologisch verträglichen Anionen in Betracht.

Als Alkoxyreste kommen solche mit 1 bis 12 C-Atomen, vorzugsweise mit 1 bis 8 C-Atomen in Betracht.

Beispielsweise sind zu nennen:

methoxy

n-propoxy-

n-butoxy-

2-methylpropoxy-

1,1-dimethylpropoxy-

hexoxy-

heptoxy-

2-ethylhexoxy-

isopropoxy-

1-methylpropoxy-

n-pentoxy-

3-methylbutoxy-

2,2-dimethylpropoxy-

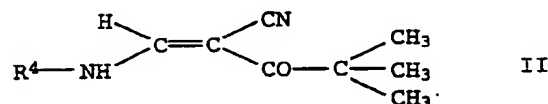
1-methyl-1-ethylpropoxy-

octoxy-

Als Mono- oder Dialkylaminoreste kommen z. B. solche in Betracht, die Alkylreste mit 1 bis 8 C-Atomen enthalten, wie Methyl-, n-Propyl-, n-Butyl-, 2-Methylpropyl-, 1,1-Dimethylpropyl-, Hexyl-, Heptyl-, 2-Ethylhexyl-, Isopropyl-, 1-Methylpropyl-, n-Pentyl-, 3-Methylbutyl-, 2,2-Dimethylpropyl-, 1-Methyl-1-ethylpropyl- und Octyl in Betracht. Diese Reste sind gleichermaßen in den Mono- und Dialkylaminocarbonyl- und Sulfonylresten enthalten.

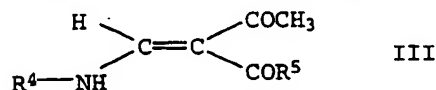
Alkoxy-carbonylreste sind z. B. Ester, die die oben genannten Alkoxyreste oder Reste von höheren Alkoholen z. B. mit bis zu 20 C-Atomen, wie iso-C₁₅-Alkohol, enthalten.

Die Erfindung betrifft auch die neuen Verbindungen der Formel II



in der die C=C Doppelbindung in der E oder Z Konfiguration vorliegt und in der R⁴ einen Phenylrest bedeutet, der gegebenenfalls durch einen oder mehrere Alkyl-, Alkoxy-, Alkylaminocarbonyl-, Alkoxy-carbonyl-, mit jeweils bis zu 20 C-Atomen oder Cyan- oder Carboxyreste oder durch wasserlöslich machende Reste ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Carboxylat-, Sulfonat- oder Alkylammoniumresten substituiert ist. Solche Reste sind z. B. Alkalicarboxylat oder Carbonyloxy-tri-(hydroxyethyl)ammonium- oder Sulfonyloxy-tri-(hydroxyethyl)ammoniumreste.

Weiterhin betrifft die Erfindung die neuen Verbindungen der Formel III,



in der die C=C Doppelbindung in der E oder Z Konfiguration vorliegt und in der R⁴ einen Phenylrest bedeutet, der gegebenenfalls durch einen oder mehrere Alkoxyreste mit bis zu 20 C-Atomen oder Alkoxy-carbonylreste mit 4 bis zu 20 C-Atomen, sowie durch wasserlöslich machende Substituenten, ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Carboxylat-, Sulfonat- oder Alkylammoniumresten, substituiert ist und R⁵ eine offenkettige, verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkoxy- oder Alkoxyalkylgruppe mit jeweils bis zu 18 C-Atomen oder eine Aryloxygruppe bedeutet.

Beispielhaft sind in der folgenden Tabelle 1 die bevorzugten erfindungsgemäßen Verbindungen der Formel III genannt.

DE 197 12 033 A 1

X	R ⁵	n	Position
C ₁₂ H ₂₅ OCO	CH ₃	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ OCO	CH ₃	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ OCO	CH ₃	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	CH ₃	1	para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	CH ₃	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ OCO	CH ₃	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ OCO	CH ₃	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	CH ₃	1	para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	CH ₃	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ OCO	CH ₃	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ OCO	CH ₃	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	CH ₃	1	para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	CH ₃	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ OCO	CH ₃	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ OCO	CH ₃	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	CH ₃	1	para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	CH ₃	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ OCO	CH ₃	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ OCO	CH ₃	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	CH ₃	1	para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	CH ₃	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ OCO	CH ₃	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ OCO	CH ₃	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	CH ₃	1	para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	CH ₃	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ OCO	CH ₃	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ OCO	CH ₃	2	ortho/para
C ₃ H ₇ OCO	C ₂ H ₅	1	para
C ₃ H ₇ OCO	C ₂ H ₅	1	meta
C ₃ H ₇ OCO	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₃ H ₇ OCO	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₄ H ₉ OCO	C ₂ H ₅	1	para
C ₄ H ₉ OCO	C ₂ H ₅	1	meta
C ₄ H ₉ OCO	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₄ H ₉ OCO	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₂ H ₅	1	para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₂ H ₅	1	meta
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₂ H ₅	1	para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₂ H ₅	1	meta
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₂ H ₅	1	para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₂ H ₅	1	meta
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₂ H ₅	1	para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₂ H ₅	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₂ H ₅	1	ortho

X	R ⁵	n	Position
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₃ H ₇	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₃ H ₇	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₃ H ₇	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₃ H ₇	1	para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₃ H ₇	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₃ H ₇	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₃ H ₇	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₃ H ₇	1	para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₃ H ₇	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₃ H ₇	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₃ H ₇	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₃ H ₇	1	para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₃ H ₇	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₃ H ₇	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₃ H ₇	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₃ H ₇	1	para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₃ H ₇	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₃ H ₇	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₃ H ₇	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₃ H ₇	1	para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₃ H ₇	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₃ H ₇	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₃ H ₇	2	ortho/para
C ₃ H ₇ OCO	C ₄ H ₉	1	para
C ₃ H ₇ OCO	C ₄ H ₉	1	meta
C ₃ H ₇ OCO	C ₄ H ₉	1	ortho
C ₃ H ₇ OCO	C ₄ H ₉	2	ortho/para
C ₄ H ₉ OCO	C ₄ H ₉	1	para
C ₄ H ₉ OCO	C ₄ H ₉	1	meta
C ₄ H ₉ OCO	C ₄ H ₉	1	ortho
C ₄ H ₉ OCO	C ₄ H ₉	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₄ H ₉	1	para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₄ H ₉	1	meta
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₄ H ₉	1	ortho
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₄ H ₉	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₄ H ₉	1	para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₄ H ₉	1	meta
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₄ H ₉	1	ortho
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₄ H ₉	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₄ H ₉	1	para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₄ H ₉	1	meta
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₄ H ₉	1	ortho
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₄ H ₉	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₄ H ₉	1	para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₄ H ₉	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₄ H ₉	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₄ H ₉	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₄ H ₉	1	para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₄ H ₉	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₄ H ₉	1	ortho

DE 197 12 033 A 1

X	R ⁵	n	Position
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₅ H ₁₁	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₅ H ₁₁	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₅ H ₁₁	1	para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₅ H ₁₁	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₅ H ₁₁	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₅ H ₁₁	1	para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₅ H ₁₁	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₅ H ₁₁	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₅ H ₁₁	1	para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₅ H ₁₁	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₅ H ₁₁	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₅ H ₁₁	1	para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₅ H ₁₁	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₅ H ₁₁	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
C ₃ H ₇ OCO	C ₆ H ₁₃	1	para
C ₃ H ₇ OCO	C ₆ H ₁₃	1	meta
C ₃ H ₇ OCO	C ₆ H ₁₃	1	ortho
C ₃ H ₇ OCO	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
C ₄ H ₉ OCO	C ₆ H ₁₃	1	para
C ₄ H ₉ OCO	C ₆ H ₁₃	1	meta
C ₄ H ₉ OCO	C ₆ H ₁₃	1	ortho
C ₄ H ₉ OCO	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₆ H ₁₃	1	para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₆ H ₁₃	1	meta
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₆ H ₁₃	1	ortho
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₆ H ₁₃	1	para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₆ H ₁₃	1	meta
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₆ H ₁₃	1	ortho
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₆ H ₁₃	1	para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₆ H ₁₃	1	meta
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₆ H ₁₃	1	ortho
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₆ H ₁₃	1	para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₆ H ₁₃	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₆ H ₁₃	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₆ H ₁₃	1	para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₆ H ₁₃	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₆ H ₁₃	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₆ H ₁₃	1	para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₆ H ₁₃	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₆ H ₁₃	1	ortho

X	R ⁵	n	Position
C ₁₅ H ₃₁ OCO	CH ₃ O	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ OCO	CH ₃ O	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ OCO	CH ₃ O	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	CH ₃ O	1	para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	CH ₃ O	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ OCO	CH ₃ O	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ OCO	CH ₃ O	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	CH ₃ O	1	para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	CH ₃ O	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ OCO	CH ₃ O	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ OCO	CH ₃ O	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	CH ₃ O	1	para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	CH ₃ O	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ OCO	CH ₃ O	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ OCO	CH ₃ O	2	ortho/para
C ₃ H ₇ OCO	C ₂ H ₅ O	1	para
C ₃ H ₇ OCO	C ₂ H ₅ O	1	meta
C ₃ H ₇ OCO	C ₂ H ₅ O	1	ortho
C ₃ H ₇ OCO	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
C ₄ H ₉ OCO	C ₂ H ₅ O	1	para
C ₄ H ₉ OCO	C ₂ H ₅ O	1	meta
C ₄ H ₉ OCO	C ₂ H ₅ O	1	ortho
C ₄ H ₉ OCO	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₂ H ₅ O	1	para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₂ H ₅ O	1	meta
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₂ H ₅ O	1	ortho
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₂ H ₅ O	1	para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₂ H ₅ O	1	meta
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₂ H ₅ O	1	ortho
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₂ H ₅ O	1	para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₂ H ₅ O	1	meta
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₂ H ₅ O	1	ortho
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₂ H ₅ O	1	para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₂ H ₅ O	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₂ H ₅ O	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₂ H ₅ O	1	para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₂ H ₅ O	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₂ H ₅ O	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₂ H ₅ O	1	para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₂ H ₅ O	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₂ H ₅ O	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₂ H ₅ O	1	para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₂ H ₅ O	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₂ H ₅ O	1	ortho

DE 197 12 033 A 1

X	R ⁵	n	Position
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₃ H ₇ OCO	C ₄ H ₉ O	1	para
C ₃ H ₇ OCO	C ₄ H ₉ O	1	meta
C ₃ H ₇ OCO	C ₄ H ₉ O	1	ortho
C ₃ H ₇ OCO	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
C ₄ H ₉ OCO	C ₄ H ₉ O	1	para
C ₄ H ₉ OCO	C ₄ H ₉ O	1	meta
C ₄ H ₉ OCO	C ₄ H ₉ O	1	ortho
C ₄ H ₉ OCO	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₄ H ₉ O	1	para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₄ H ₉ O	1	meta
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₄ H ₉ O	1	ortho
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₄ H ₉ O	1	para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₄ H ₉ O	1	meta
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₄ H ₉ O	1	ortho
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₄ H ₉ O	1	para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₄ H ₉ O	1	meta
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₄ H ₉ O	1	ortho
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₄ H ₉ O	1	para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₄ H ₉ O	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₄ H ₉ O	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₄ H ₉ O	1	para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₄ H ₉ O	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₄ H ₉ O	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₄ H ₉ O	1	para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₄ H ₉ O	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₄ H ₉ O	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₄ H ₉ O	1	para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₄ H ₉ O	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₄ H ₉ O	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₄ H ₉ O	1	para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₄ H ₉ O	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₄ H ₉ O	1	ortho

X	R ⁵	n	Position
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₃ H ₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₃ H ₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₃ H ₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₃ H ₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₄ H ₉ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₄ H ₉ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₄ H ₉ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₄ H ₉ OCO	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho

DE 197 12 033 A 1

X	R ^S	n	Position
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
C ₃ H ₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₃ H ₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₃ H ₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₃ H ₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₄ H ₉ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₄ H ₉ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₄ H ₉ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₄ H ₉ OCO	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho

X	R ⁵	n	Position
C ₃ H ₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	meta
C ₃ H ₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	ortho
C ₃ H ₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	2	ortho/para
C ₄ H ₉ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	para
C ₄ H ₉ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	meta
C ₄ H ₉ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	ortho
C ₄ H ₉ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	meta
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	ortho
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	meta
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	ortho
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	meta
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	ortho
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₁₄ H ₂₉ O	2	ortho/para
C ₃ H ₇ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	para
C ₃ H ₇ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	meta
C ₃ H ₇ OCO	C ₁₆ H ₃₃ O	1	ortho

DE 197 12 033 A 1

X	R ^S	n	Position
C ₄ H ₉ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	meta
C ₄ H ₉ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	ortho
C ₄ H ₉ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	para
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	meta
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	ortho
C ₅ H ₁₁ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	para
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	meta
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	ortho
C ₆ H ₁₃ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	para
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	meta
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	ortho
C ₈ H ₁₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	para
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	para
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	para
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	para
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	para
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	para
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	para
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ OCO	C ₁₈ H ₃₇ O	2	ortho/para
CH ₃ O	CH ₃	1	para
CH ₃ O	CH ₃	1	meta
CH ₃ O	CH ₃	1	ortho
CH ₃ O	CH ₃	2	ortho/para
C ₂ H ₅ O	CH ₃	1	para
C ₂ H ₅ O	CH ₃	1	meta
C ₂ H ₅ O	CH ₃	1	ortho

X	R ⁵	n	Position
CH ₃ O	C ₂ H ₅	1	meta
CH ₃ O	C ₂ H ₅	1	ortho
CH ₃ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₂ H ₅ O	C ₂ H ₅	1	para
C ₂ H ₅ O	C ₂ H ₅	1	meta
C ₂ H ₅ O	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₂ H ₅ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₃ H ₇ O	C ₂ H ₅	1	para
C ₃ H ₇ O	C ₂ H ₅	1	meta
C ₃ H ₇ O	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₃ H ₇ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₄ H ₉ O	C ₂ H ₅	1	para
C ₄ H ₉ O	C ₂ H ₅	1	meta
C ₄ H ₉ O	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₄ H ₉ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ O	C ₂ H ₅	1	para
C ₅ H ₁₁ O	C ₂ H ₅	1	meta
C ₅ H ₁₁ O	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₅ H ₁₁ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ O	C ₂ H ₅	1	para
C ₆ H ₁₃ O	C ₂ H ₅	1	meta
C ₆ H ₁₃ O	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₆ H ₁₃ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ O	C ₂ H ₅	1	para
C ₈ H ₁₇ O	C ₂ H ₅	1	meta
C ₈ H ₁₇ O	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₈ H ₁₇ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₂ H ₅	1	para
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₂ H ₅	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₂ H ₅	1	para
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₂ H ₅	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₂ H ₅	1	para
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₂ H ₅	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₂ H ₅	1	para
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₂ H ₅	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₂ H ₅	1	para
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₂ H ₅	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₂ H ₅	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₂ H ₅	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₂ H ₅	1	para
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₂ H ₅	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₂ H ₅	1	ortho

DE 197 12 033 A 1

X	R ⁵	n	Position
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₃ H ₇	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₃ H ₇	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₃ H ₇	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₃ H ₇	1	para
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₃ H ₇	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₃ H ₇	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₃ H ₇	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₃ H ₇	1	para
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₃ H ₇	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₃ H ₇	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₃ H ₇	2	ortho/para
CH ₃ O	C ₄ H ₉	1	para
CH ₃ O	C ₄ H ₉	1	meta
CH ₃ O	C ₄ H ₉	1	ortho
CH ₃ O	C ₄ H ₉	2	ortho/para
C ₂ H ₅ O	C ₄ H ₉	1	para
C ₂ H ₅ O	C ₄ H ₉	1	meta
C ₂ H ₅ O	C ₄ H ₉	1	ortho
C ₂ H ₅ O	C ₄ H ₉	2	ortho/para
C ₃ H ₇ O	C ₄ H ₉	1	para
C ₃ H ₇ O	C ₄ H ₉	1	meta
C ₃ H ₇ O	C ₄ H ₉	1	ortho
C ₃ H ₇ O	C ₄ H ₉	2	ortho/para
C ₄ H ₉ O	C ₄ H ₉	1	para
C ₄ H ₉ O	C ₄ H ₉	1	meta
C ₄ H ₉ O	C ₄ H ₉	1	ortho
C ₄ H ₉ O	C ₄ H ₉	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ O	C ₄ H ₉	1	para
C ₅ H ₁₁ O	C ₄ H ₉	1	meta
C ₅ H ₁₁ O	C ₄ H ₉	1	ortho
C ₅ H ₁₁ O	C ₄ H ₉	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ O	C ₄ H ₉	1	para
C ₆ H ₁₃ O	C ₄ H ₉	1	meta
C ₆ H ₁₃ O	C ₄ H ₉	1	ortho
C ₆ H ₁₃ O	C ₄ H ₉	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ O	C ₄ H ₉	1	para
C ₈ H ₁₇ O	C ₄ H ₉	1	meta
C ₈ H ₁₇ O	C ₄ H ₉	1	ortho
C ₈ H ₁₇ O	C ₄ H ₉	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₄ H ₉	1	para
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₄ H ₉	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₄ H ₉	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₄ H ₉	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₄ H ₉	1	para
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₄ H ₉	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₄ H ₉	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₄ H ₉	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₄ H ₉	1	para
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₄ H ₉	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₄ H ₉	1	ortho

X	R ⁵	n	Position
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₅ H ₁₁	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₅ H ₁₁	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₅ H ₁₁	1	para
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₅ H ₁₁	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₅ H ₁₁	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₅ H ₁₁	1	para
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₅ H ₁₁	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₅ H ₁₁	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₅ H ₁₁	1	para
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₅ H ₁₁	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₅ H ₁₁	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₅ H ₁₁	1	para
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₅ H ₁₁	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₅ H ₁₁	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₅ H ₁₁	1	para
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₅ H ₁₁	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₅ H ₁₁	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₅ H ₁₁	2	ortho/para
CH ₃ O	C ₆ H ₁₃	1	para
CH ₃ O	C ₆ H ₁₃	1	meta
CH ₃ O	C ₆ H ₁₃	1	ortho
CH ₃ O	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
C ₂ H ₅ O	C ₆ H ₁₃	1	para
C ₂ H ₅ O	C ₆ H ₁₃	1	meta
C ₂ H ₅ O	C ₆ H ₁₃	1	ortho
C ₂ H ₅ O	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
C ₃ H ₇ O	C ₆ H ₁₃	1	para
C ₃ H ₇ O	C ₆ H ₁₃	1	meta
C ₃ H ₇ O	C ₆ H ₁₃	1	ortho
C ₃ H ₇ O	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
C ₄ H ₉ O	C ₆ H ₁₃	1	para
C ₄ H ₉ O	C ₆ H ₁₃	1	meta
C ₄ H ₉ O	C ₆ H ₁₃	1	ortho
C ₄ H ₉ O	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ O	C ₆ H ₁₃	1	para
C ₅ H ₁₁ O	C ₆ H ₁₃	1	meta
C ₅ H ₁₁ O	C ₆ H ₁₃	1	ortho
C ₅ H ₁₁ O	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ O	C ₆ H ₁₃	1	para
C ₆ H ₁₃ O	C ₆ H ₁₃	1	meta
C ₆ H ₁₃ O	C ₆ H ₁₃	1	ortho
C ₆ H ₁₃ O	C ₆ H ₁₃	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ O	C ₆ H ₁₃	1	para
C ₈ H ₁₇ O	C ₆ H ₁₃	1	meta
C ₈ H ₁₇ O	C ₆ H ₁₃	1	ortho

DE 197 12 033 A 1

X	R ⁵	n	Position
C ₆ H ₁₃ O	CH ₃ O	1	meta
C ₆ H ₁₃ O	CH ₃ O	1	ortho
C ₆ H ₁₃ O	CH ₃ O	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ O	CH ₃ O	1	para
C ₈ H ₁₇ O	CH ₃ O	1	meta
C ₈ H ₁₇ O	CH ₃ O	1	ortho
C ₈ H ₁₇ O	CH ₃ O	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ O	CH ₃ O	1	para
C ₁₂ H ₂₅ O	CH ₃ O	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ O	CH ₃ O	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ O	CH ₃ O	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ O	CH ₃ O	1	para
C ₁₃ H ₂₇ O	CH ₃ O	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ O	CH ₃ O	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ O	CH ₃ O	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ O	CH ₃ O	1	para
C ₁₄ H ₂₉ O	CH ₃ O	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ O	CH ₃ O	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ O	CH ₃ O	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ O	CH ₃ O	1	para
C ₁₅ H ₃₁ O	CH ₃ O	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ O	CH ₃ O	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ O	CH ₃ O	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ O	CH ₃ O	1	para
C ₁₆ H ₃₃ O	CH ₃ O	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ O	CH ₃ O	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ O	CH ₃ O	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ O	CH ₃ O	1	para
C ₁₇ H ₃₅ O	CH ₃ O	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ O	CH ₃ O	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ O	CH ₃ O	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ O	CH ₃ O	1	para
C ₁₈ H ₃₇ O	CH ₃ O	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ O	CH ₃ O	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ O	CH ₃ O	2	ortho/para
CH ₃ O	C ₂ H ₅ O	1	para
CH ₃ O	C ₂ H ₅ O	1	meta
CH ₃ O	C ₂ H ₅ O	1	ortho
CH ₃ O	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
C ₂ H ₅ O	C ₂ H ₅ O	1	para
C ₂ H ₅ O	C ₂ H ₅ O	1	meta
C ₂ H ₅ O	C ₂ H ₅ O	1	ortho
C ₂ H ₅ O	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
C ₃ H ₇ O	C ₂ H ₅ O	1	para
C ₃ H ₇ O	C ₂ H ₅ O	1	meta
C ₃ H ₇ O	C ₂ H ₅ O	1	ortho
C ₃ H ₇ O	C ₂ H ₅ O	2	ortho/para
C ₄ H ₉ O	C ₂ H ₅ O	1	para
C ₄ H ₉ O	C ₂ H ₅ O	1	meta
C ₄ H ₉ O	C ₂ H ₅ O	1	ortho

X	R ⁵	n	Position
C ₃ H ₇ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₃ H ₇ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₃ H ₇ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₄ H ₉ O	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₄ H ₉ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₄ H ₉ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₄ H ₉ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ O	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₅ H ₁₁ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₅ H ₁₁ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₅ H ₁₁ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ O	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₆ H ₁₃ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₆ H ₁₃ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₆ H ₁₃ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ O	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₈ H ₁₇ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₈ H ₁₇ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₈ H ₁₇ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₃ H ₇ O	1	para
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₃ H ₇ O	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₃ H ₇ O	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₃ H ₇ O	2	ortho/para
CH ₃ O	C ₄ H ₉ O	1	meta
CH ₃ O	C ₄ H ₉ O	1	para
CH ₃ O	C ₄ H ₉ O	1	ortho

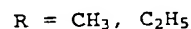
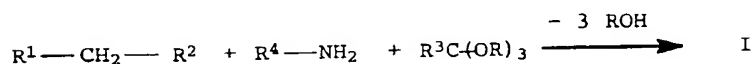
DE 197 12 033 A 1

X	R ⁵	n	Position
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₄ H ₉ O	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₄ H ₉ O	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₄ H ₉ O	2	ortho/para
CH ₃ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
CH ₃ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
CH ₃ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
CH ₃ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₂ H ₅ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
C ₂ H ₅ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₂ H ₅ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
C ₂ H ₅ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₃ H ₇ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
C ₃ H ₇ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₃ H ₇ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
C ₃ H ₇ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₄ H ₉ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
C ₄ H ₉ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₄ H ₉ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
C ₄ H ₉ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
C ₅ H ₁₁ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₅ H ₁₁ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
C ₅ H ₁₁ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
C ₆ H ₁₃ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₆ H ₁₃ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
C ₆ H ₁₃ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
C ₈ H ₁₇ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₈ H ₁₇ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
C ₈ H ₁₇ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₅ H ₁₁ O	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₅ H ₁₁ O	1	para
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₅ H ₁₁ O	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₅ H ₁₁ O	1	ortho

X	R ⁵	n	Position
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₆ H ₁₃ O	1	para
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₆ H ₁₃ O	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₆ H ₁₃ O	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₆ H ₁₃ O	2	ortho/para
CH ₃ O	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
CH ₃ O	C ₇ H ₁₅ O	1	para
CH ₃ O	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
CH ₃ O	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
C ₂ H ₅ O	C ₇ H ₁₅ O	1	para
C ₂ H ₅ O	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
C ₂ H ₅ O	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
C ₂ H ₅ O	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
C ₃ H ₇ O	C ₇ H ₁₅ O	1	para
C ₃ H ₇ O	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
C ₃ H ₇ O	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
C ₃ H ₇ O	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
C ₄ H ₉ O	C ₇ H ₁₅ O	1	para
C ₄ H ₉ O	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
C ₄ H ₉ O	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
C ₄ H ₉ O	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
C ₅ H ₁₁ O	C ₇ H ₁₅ O	1	para
C ₅ H ₁₁ O	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
C ₅ H ₁₁ O	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
C ₅ H ₁₁ O	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
C ₆ H ₁₃ O	C ₇ H ₁₅ O	1	para
C ₆ H ₁₃ O	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
C ₆ H ₁₃ O	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
C ₆ H ₁₃ O	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
C ₈ H ₁₇ O	C ₇ H ₁₅ O	1	para
C ₈ H ₁₇ O	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
C ₈ H ₁₇ O	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
C ₈ H ₁₇ O	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₇ H ₁₅ O	1	para
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₇ H ₁₅ O	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₇ H ₁₅ O	1	para
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₇ H ₁₅ O	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₇ H ₁₅ O	1	ortho

X	R ⁵	n	Position
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₂ H ₂₅ O	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₃ H ₂₇ O	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₄ H ₂₉ O	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₅ H ₃₁ O	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₆ H ₃₃ O	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₇ H ₃₅ O	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₈ H ₁₇ O	1	para
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₈ H ₁₇ O	1	meta
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₈ H ₁₇ O	1	ortho
C ₁₈ H ₃₇ O	C ₈ H ₁₇ O	2	ortho/para

Die erfindungsgemäß zu verwendenden Verbindungen der Formel I bis III können nach der Gleichung



durch Kondensation hergestellt werden, wobei R¹ bis R⁴ die oben genannte Bedeutung haben.

Beispielsweise ergibt die Umsetzung von 2,4-Pentandion mit Anthranilsäure-2-ethylhexylester und Triethylorthoformiat die Verbindung 24 in Tabelle 2.

Die Lichtschutzmittel enthaltenden kosmetischen und pharmazeutischen Zubereitungen sind in der Regel auf der Basis eines Trägers, der mindestens eine Ölphase enthält. Es sind aber auch Zubereitungen allein auf wäßriger Basis bei Verwendung von Verbindungen mit hydrophilen Substituenten möglich. Demgemäß kommen Öle, Öl-in-Wasser- und Wasser-in-Öl-Emulsionen, Cremes und Pasten, Lippenchutzstiftmassen oder fettfreie Gele in Betracht.

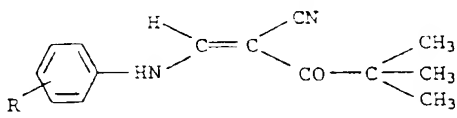
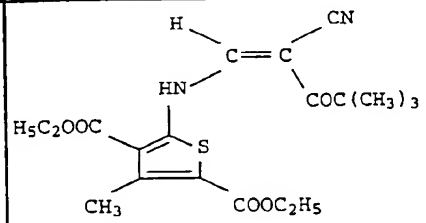
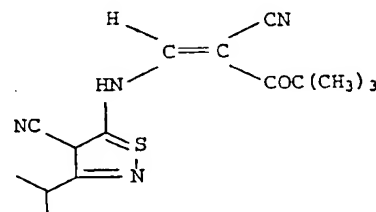
Solche Sonnenschutzpräparate können demgemäß in flüssiger, pastöser oder fester Form vorliegen, beispielsweise als Wasser-in-Öl-Cremes, Öl-in-Wasser-Cremes und -Lotionen, Aerosol-Schaumcremes, Gele, Öle, Fettstifte, Puder, Sprays oder alkoholisch-wäßrige Lotionen.

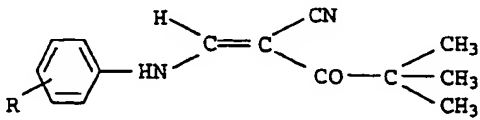
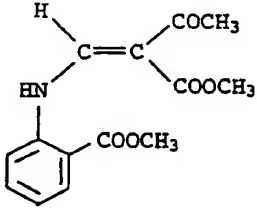
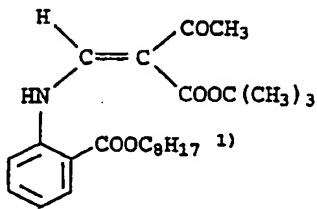
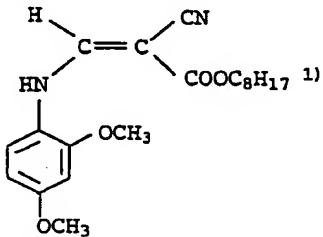
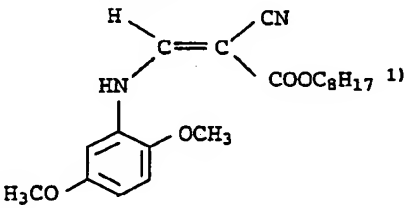
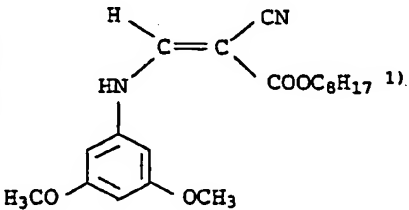
Übliche Ölkomponenten in der Kosmetik sind beispielsweise Paraffinöl, Glycerylstearat, Isopropylmyristat, Diisopropyladipat, 2-Ethylhexansäurecetylstearylester, hydriertes Polyisobuten, Vaseline, Caprylsäure/Caprinsäure-Triglyceride, mikrokristallines Wachs, Lanolin und Stearinsäure.

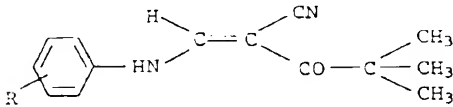
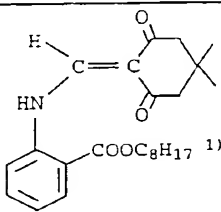
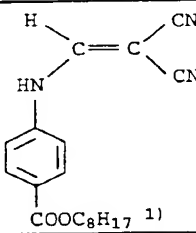
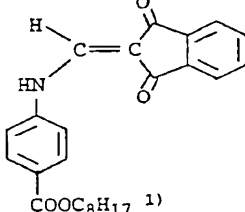
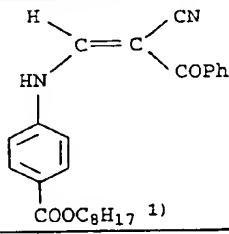
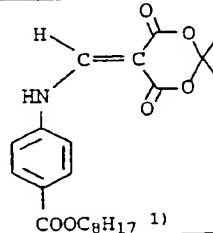
Übliche kosmetische Hilfsstoffe, die als Zusätze in Betracht kommen können, sind z. B. Co-Emulgatoren, Fette und Wachse, Stabilisatoren, Verdickungsmittel, biogene Wirkstoffe, Filmbildner, Duftstoffe, Farbstoffe, Perlglanzmittel, Konservierungsmittel, Pigmente, Elektrolyte (z. B. Magnesiumsulfat) und pH-Regulatoren. Als Co-Emulgatoren kommen vorzugsweise bekannte W/O- und daneben auch O/W-Emulgatoren wie etwa Polyglycerinester, Sorbitanester oder teilveresterte Glyceride in Betracht. Typische Beispiele für Fette sind Glyceride; als Wachse sind u. a. Bienenwachs, Paraffinwachs oder Mikrowachse gegebenenfalls in Kombination mit hydrophilen Wachsen zu nennen. Als Stabilisatoren können Metallsalze von Fettsäuren wie z. B. Magnesium-, Aluminium- und/oder Zinkstearat eingesetzt werden. Geeig-

Nr.	Stoff	CAS-Nr. (=Säure)
1	4-Aminobenzoesäure	150-13-0
2	3-(4'-Trimethylammonium)-benzylidenbornan-2-on-methylsulfat	52793-97-2
3	3,3,5-Trimethyl-cyclohexyl-salicylat (Homosalatum)	118-56-9
4	2-Hydroxy-4-methoxy-benzophenon (Oxybenzonum)	131-57-7
5	2-Phenylbenzimidazol-5-sulfonsäure und ihre Kalium-, Natrium- u. Triethanolaminsalze	27503-81-7
6	3,3'-(1,4-Phenylendi-methin)-bis(7,7-dimethyl-2-oxobicyclo[2.2.1]heptan-1-methansulfonsäure) und ihre Salze	90457-82-2
7	4-Bis(polyethoxy)amino-benzoesäurepolyethoxy-ethylester	113010-52-9
8	4-Dimethylamino-benzoesäure-2-ethylhexylester	21245-02-3
9	Salicylsäure-2-ethylhexylester	118-60-5
10	4-Methoxy-zimtsäure-2-isoamylester	7/6/7-10-2
11	4-Methoxy-zimtsäure-2-ethylhexylester	5466-77-3
12	2-Hydroxy-4-methoxy-benzophenon-5-sulfon- (Sulisobenzonum) und das Natriumsalz	4065-45-6
13	3-(4'-Sulfo)benzyliden-bornan-2-on und Salze	58030-58-6
14	3-(4'-Methyl)benzyliden-bornan-2-on	36861-47-9
15	3-Benzylidenbornan-2-on	16087-24-8
16	1-(4'-Isopropylphenyl)-3-phenylpropan-1,3-dion	63260-25-9
17	4-Isopropylbenzylsalicylat	94134-93-7
18	2,4,6-Trianilin-(o-carbo-2'-ethylhexyl-1'-oxy)-1,3,5-triazin	88122-99-0
19	3-Imidazol-4-yl-acrylsäure und ihr Ethylester	104-98-3*
20	2-Cyano-3,3-diphenylacrylsäureethylester	5232-99-5
21	2-Cyano-3,3-diphenylacrylsäure-2'-ethylhexyl-ester	6197-30-4
22	Menthyl-o-aminobenzoate oder: 5-Methyl-2-(1-methylethyl)-2-aminobenzoate	134-09-8
23	Glyceryl p-aminobenzoat oder: 4-Aminobenzoesäure-1-glyceryl-ester	136-44-7
24	2,2'-Dihydroxy-4-methoxybenzophenon (Dioxybenzone)	131-53-3
25	2-Hydroxy-4-methoxy-4-methylbenzophenon (Mexonon)	1641-17-4
26	Triethanolamin Salicylat	2174-16-5
27	Dimethoxyphenylglyoxalsäure oder: 3,4-dimethoxy-phenyl-glyoxal-saures Natrium	
28	3-(4'Sulfo)benzyliden-bornan-2-on und seine Salze	56039-58-8

Tabelle 2

			
Nr.	R	λ_{\max}	$E^{1,1}$
1)	4-COOC ₈ H ₁₇ ¹⁾	346	860
2)	3-CH ₃	338	978
3)	4-OCH ₃	348	841
4)	4-tert.-C ₄ H ₉	342	888
5)	4-n-C ₄ H ₉	342	884
6)	4-CONHC ₈ H ₁₇ ¹⁾	346	773
7)	4-iso-C ₃ H ₇	342	903
8)	4-n-C ₃ H ₇	342	918
9)	2-COOC ₈ H ₁₇ ¹⁾	348	717
10)	2-CN	338	995
11)	2-COOC ₁₅ H ₃₁ (iso) ⁽⁵¹⁾	346	583
12)	3-iso OC ₃ H ₇	340	829
13)	2-COO ⁻ x N ⁺ H(C ₂ H ₄ OH) ₃	346	667 (Wasser)
14)	2,5-Di-OCH ₃	362	491
15)	2-COOH	346	965
16)	4-SO ₃ ⁻ x ⁺ HN(C ₂ H ₄ OH) ₃	340	666 (Wasser)
17)	4-SO ₃ ⁻ Na ⁺	340	1010 (Wasser)
18)	2-OC ₂ H ₅	352	876
19)	2-COOCH ₃	348	995
20)	2-COOCH ₂ CH(CH ₃) ₂	348	864
21)	2-COOC ₄ H ₉	346	825
Nr.	Verbindung	λ_{\max}	$E^{1,1}$
22)		380	768
23)		350	817

			
Nr.	R	λ_{\max}	E^{11}
30)		344	1008
31)		344	717
32)		346	646
33)		350	612
34)		322	761

			
Nr.	R	λ_{max}	$E^{1,1}$
40)		358	743
41)		330	1191
42)		374	1175
43)		362	869
44)		336	896

¹⁾ C₈H₁₇ = 2-Ethylhexyl

DE 197 12 033 A 1

Beispiel 7

Zusammensetzung für Sunblocker mit Mikropigmenten

ad 100 Wasser	5
10,00 Octyl Methoxycinnamat	
6,00 PEG-7-Hydrogenated Castor Öl	
6,00 Titanium Dioxid	
0,5-10 Verbindung Nr. 24 der Tabelle 2	
5,00 Mineral Öl	10
5,00 Isoamyl p-Methoxycinnamat	
5,00 Propylen Glycol	
3,00 Jojoba Öl	
3,00 4-Methylbenzyliden Campher	
2,00 PEG-45/Dodecyl Glycol Copolymer	15
1,00 Dimethicon	
0,50 PEG-40-Hydrogenated Castor Öl	
0,50 Tocopheryl Acetat	
0,50 Phenoxyethanol	
0,20 EDTA	20

Beispiel 8

Fettfreies Gel

ad 100 Wasser	25
8,00 Octyl Methoxycinnamat	
7,00 Titanium Dioxid	
0,5-10 Verbindung Nr. 1 der Tabelle 2	
5,00 Glycerin	30
5,00 PEG-25 PABA	
1,00 4-Methylbenzyliden Campher	
0,40 Acrylate C10-C30 Alkyl Acrylat Crosspolymer	
0,30 Imidazolidinyl Urea	
0,25 Hydroxyethyl Cellulose	35
0,25 Sodium Methylparaben	
0,20 Disodium EDTA	
0,15 Fragrance	
0,15 Sodium Propylparaben	
0,10 Sodium Hydroxid	40

Beispiel 9

Fettfreies Gel

ad 100 Wasser	45
8,00 Octyl Methoxycinnamat	
7,00 Titanium Dioxid	
0,5-10 Verbindung Nr. 24 der Tabelle 2	
5,00 Glycerin	50
5,00 PEG-25 PABA	
1,00 4-Methylbenzyliden Campher	
0,40 Acrylate C10-C30 Alkyl Acrylat Crosspolymer	
0,30 Imidazolidinyl Urea	
0,25 Hydroxyethyl Cellulose	55
0,25 Sodium Methylparaben	
0,20 Disodium EDTA	
0,15 Fragrance	
0,15 Sodium Propylparaben	
0,10 Sodium Hydroxid	60

Beispiel 10

Sonnencreme (LSF 20)

ad 100 Wasser	65
8,00 Octyl Methoxycinnamat	
8,00 Titanium Dioxid	

DE 197 12 033 A 1

4,00 Glycerin	
3,00 Jojoba Öl	
2,00 4-Methylbenzyliden Campher	
2,00 Titanium Dioxid	
1,50 PEG-45/Dodecyl Glycol Copolymer	5
1,50 Dimethicon	
0,70 Magnesium Sulfat	
0,50 Magnesium Stearat	
0,15 Fragrance	10

Beispiel 14

Sonnennmilch (LSF 6)

ad 100 Wasser	15
10,00 Mineral Öl	
6,00 PEG-7-Hydrogenated Castor Öl	
5,00 Isopropyl Palmitat	
3,50 Octyl Methoxycinnamat	
0,5-10 Verbindung Nr. 1 der Tabelle 2	20
3,00 Caprylic/Capric Triglycerid	
3,00 Jojoba Öl	
2,00 PEG-45/Dodecyl Glycol Copolymer	
0,70 Magnesium Sulfat	
0,60 Magnesium Stearat	25
0,50 Tocopheryl Acetat	
0,30 Glycerin	
0,25 Methylparaben	
0,15 Propylparaben	
0,05 Tocopherol	30

Beispiel 15

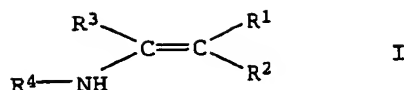
Sonnennmilch (LSF 6)

ad 100 Wasser	35
10,00 Mineral Öl	
6,00 PEG-7-Hydrogenated Castor Öl	
5,00 Isopropyl Palmitat	
3,50 Octyl Methoxycinnamat	40
0,5-10 Verbindung Nr. 24 der Tabelle 2	
3,00 Caprylic/Capric Triglycerid	
3,00 Jojoba Öl	
2,00 PEG-45/Dodecyl Glycol Copolymer	
0,70 Magnesium Sulfat	45
0,60 Magnesium Stearat	
0,50 Tocopheryl Acetat	
0,30 Glycerin	
0,25 Methylparaben	
0,15 Propylparaben	50
0,05 Tocopherol	

Beispiel 16

Sonnencreme wasserfest

ad 100 Wasser	
8,00 Octyl Methoxycinnamat	
5,00 PEG-7-Hydrogenated Castor Öl	
5,00 Propylene Glycol	60
4,00 Isopropyl Palmitat	
4,00 Caprylic/Capric Triglycerid	
0,5-10 Verbindung Nr. 17 der Tabelle 2	
0,5-10 Verbindung Nr. 24 der Tabelle 2	
4,00 Glycerin	65
3,00 Jojoba Öl	
2,00 4-Methylbenzyliden Campher	
2,00 Titanium Dioxid	



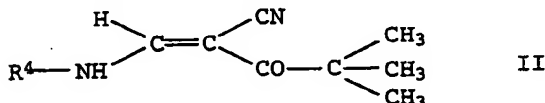
enthalten, in der die Variablen die Bedeutung gemäß Anspruch 1 haben.

8. Lichtschutzmittel gemäß Anspruch 7, enthaltend als UV-A-Filter Verbindungen der Formel I, wobei R^3 für Wasserstoff, R^1 für CN, COOR^5 und COR^5 und R^2 für CN, COOR^6 und COR^6 stehen, wobei R^5 und R^6 gegebenenfalls substituierte aliphatische oder aromatische Reste mit bis zu 8 C-Atomen bedeuten.

9. Lichtschutzmittel gemäß Anspruch 7, enthaltend als UV-A-Filter Verbindungen der Formel I, wobei R^4 für gegebenenfalls durch hydrophile oder lipophile Substituenten substituiertes Phenyl steht.

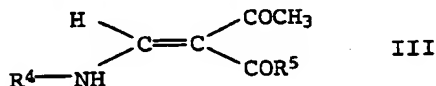
10. Lichtschutzmittel gemäß Anspruch 7, enthaltend als UV-A-Filter Verbindungen der Formel I, wobei R^3 für Wasserstoff, R^1 für CN, COOR^5 und COR^5 und R^2 für CN, COOR^6 und COR^6 stehen und R^4 für einen Phenylrest steht, der durch Alkyl-, Alkoxy-, Alkylaminocarbonyl-, Alkoxy-carbonylreste, mit jeweils bis zu 20 C-Atomen, oder mit Cyan- oder Carboxyresten, sowie mit wasserlöslich machenden Substituenten, ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Carboxylat-, Sulfonat- oder Alkylammoniumresten, substituiert sein kann.

11. Neue Verbindungen der Formel II,



in der die $\text{C}=\text{C}$ Doppelbindung in der E oder Z Konfiguration vorliegt und in der R^4 einen Phenylrest bedeutet, der durch einen oder mehrere Alkyl-, Alkoxy-, Alkylaminocarbonyl-, Alkoxy-carbonylreste, mit jeweils bis zu 20 C-Atomen oder Cyan- oder Carboxyreste, sowie durch wasserlöslich machende Substituenten, ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Carboxylat-, Sulfonat- oder Alkylammoniumresten, substituiert sein kann.

12. Neue Verbindungen der Formel III,



in der die $\text{C}=\text{C}$ Doppelbindung in der E oder Z Konfiguration vorliegt und in der R^4 einen Phenylrest bedeutet, der durch einen oder mehrere Alkoxyreste mit bis zu 20 C-Atomen oder Alkoxy-carbonylreste mit 4 bis zu 20 C-Atomen, sowie durch wasserlöslich machende Substituenten, ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Carboxylat-, Sulfonat- oder Alkylammoniumresten, substituiert sein kann und R^5 eine offenkettige, verzweigte oder cyclische Alkyl-, Alkoxy-, oder Alkoxyalkylgruppe mit jeweils bis zu 18 C-Atomen oder eine Aryloxygruppe bedeutet.

13. Verbindungen der Formel I zur Verwendung als Arzneimittel.

14. Pharmazeutische Zubereitung, dadurch gekennzeichnet, daß sie eine wirksame Menge mindestens einer der Verbindung der Formel I nach Anspruch 1 enthält.